

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO BICOCCA

FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE FISICHE E NATURALI

DIPARTIMENTO DI FISICA “GIUSEPPE OCCHIALINI”



AGGIUNTE ALL'ELABORATO DI FISICA
COMPUTAZIONALE

Professore: Leonardo Giusti

Studenti: Federico De Matteis, Joshua Finati, Francesco Morelato

A.A. 2022-2023

Indice

1	Approfondimenti sull'oscillatore armonico	3
1.1	Autofunzione dello stato di ground	3
1.2	Il secondo stato eccitato dell'oscillatore armonico: generalizzazione	4
1.3	Hamiltoniana 2D	6
2	Oscillatore armonico perturbato da $\lambda\hat{x}^4$	8
2.1	Stima perturbativa di $\Delta\tilde{E}_{01}$ e $ M_{01} ^2$	9
2.2	Limite non perturbativo	10
3	Potenziale Double Well	12
3.1	Analisi dell'effetto tunnel	12
3.2	Distribuzione dello stato fondamentale	15
3.3	Calcolo del gap di energia	15

Introduzione

L'esperienza del laboratorio di Fisica Computazionale ci ha fornito gli strumenti per simulare un sistema quantistico attraverso la formulazione del path integral. Di seguito ci proponiamo di studiare ulteriori aspetti dell'oscillatore armonico ed estendere la trattazione a sistemi anarmonici.

Nella prima parte mostriamo come estrarre l'autofunzione dello stato di ground riproducendo i risultati dello studio di M. Creutz e B. Freedman¹. Proseguiamo nell'analisi mostrando un metodo per estrarre il gap energetico tra il primo e il secondo stato eccitato. Nella seconda parte consideriamo il potenziale anarmonico della forma $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \lambda x^4$ mostrando che, computazionalmente, si ottengono gli stessi risultati della la teoria delle perturbazioni nel limite di $\lambda \ll 1$. In seguito estraiamo risultati per $\lambda \simeq 1$ di cui non possediamo la soluzione esatta.

Infine studieremo il sistema a *double well* con un potenziale della forma $V(x) = \beta(x^2 - \alpha/2\beta)^2$ mostrando l'effetto del tunneling quantistico e le complicazioni che questo comporta nell'implementazione dell'algoritmo Metropolis. Anche in questo caso mostriamo che per una opportuna scelta dei parametri è possibile risolvere il sistema perturbativamente con correzioni sufficientemente piccole da poter essere confrontate con il risultato non perturbativo delle simulazioni.

Per concludere mostriamo come replicare in due dimensioni quanto fatto precedentemente.

¹[1]

1 Approfondimenti sull'oscillatore armonico

1.1 Autofunzione dello stato di ground

In questa sezione vogliamo ricostruire la funzione densità di probabilità dello stato di ground $|\phi_0(x)|^2$ sfruttando la formulazione del path integral.

Ricordiamo brevemente che, nel discreto:

$$|\tilde{\phi}_0(x)|^2 = \sqrt{\frac{m\bar{\omega}}{\pi}} e^{-m\bar{\omega}x^2} \quad (1)$$

con

$$\bar{\omega} = \omega \sqrt{1 + \frac{a^2\omega^2}{4}}$$

Nel nostro caso abbiamo utilizzato $a = \omega = m = 1$, perciò ci aspettiamo che il vuoto dell'energia sia uno stato il cui modulo quadro, nello spazio delle configurazioni, è una gaussiana centrata in zero e di larghezza $\sigma = \frac{1}{\sqrt[4]{5}} \sim 0.66874$. La densità di probabilità $P(x_i)$ che la particella si trovi in una posizione x_i può essere ricavata tramite la formulazione del path integral come²

$$\frac{P(x_i)}{\Delta x_i} = |\phi_0(x_i)|^2 + O\left(\frac{1}{(E_1 - E_0)T}\right) \quad (2)$$

dove $T = 64$ è la dimensione del reticolo temporale. Grazie a questa formula possiamo mettere in relazione la funzione densità di probabilità dello stato di ground con la frequenza relativa che la particella si trovi in un intervallo Δx_i .

Per calcolare tale frequenza relativa suddividiamo quindi l'asse spaziale in N_{bin} intervalli equispaziati nell'intervallo $[x_{min}, x_{max}]$ di larghezza $\Delta x_i = \frac{x_{max} - x_{min}}{N_B}$. Costruiamo l'istogramma di figura (1) con il seguente algoritmo³:

- Effettuiamo uno *sweep* nella catena di Markov.
- Scorrendo sul vettore di posizioni, convertiamo il valore double che rappresenta la posizione occupata dalla particella `xx[i]` nell'indice j - che rappresenta il numero della colonna dell'istogramma - con la seguente equazione:

$$j = \text{round}\left(\frac{\text{xx}[i] - x_{min}}{x_{max} - x_{min}} N\right) \quad (3)$$

- incrementiamo di un'unità il valore dell'istogramma nella posizione j .
- infine normalizziamo l'istogramma per avere norma unitaria.

Una volta ottenuto l'istogramma effettuiamo un fit con una funzione del tipo (tabella ??):

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma^2} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4)$$

²eq. (A.26) Creutz[1]

³dopo aver termalizzato l'algoritmo Metropolis

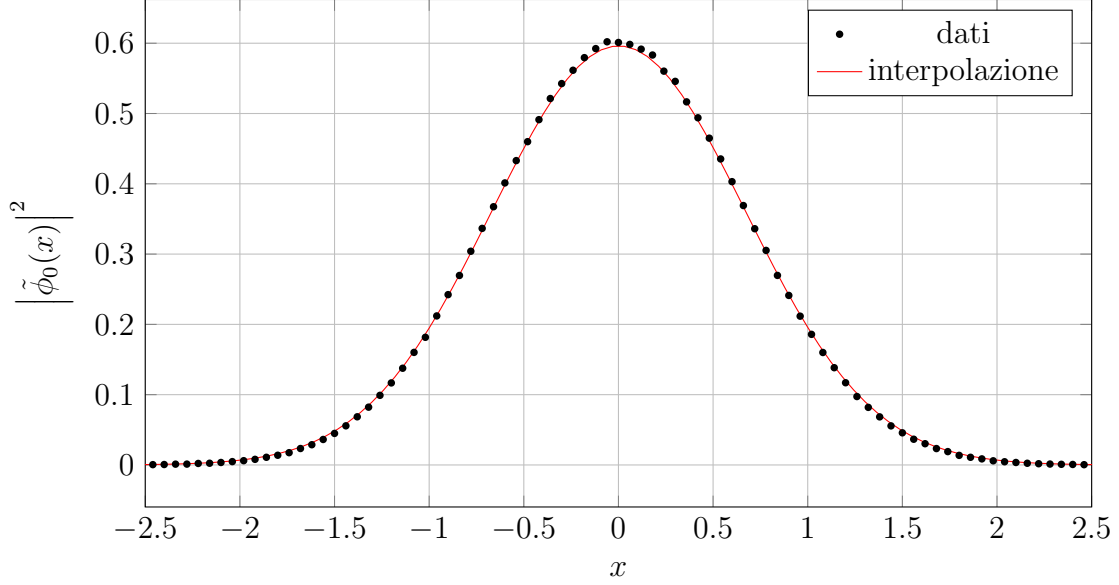


Figura 1: Interpolazione della funzione densità di probabilità dello stato di ground

Tabella 1: Fit

N_{sweep}	N_B	x_{min}	x_{max}	μ	σ
10^6	50	-3.0	3.0	0.66986(8)	0.00027(10)

1.2 Il secondo stato eccitato dell'oscillatore armonico: generalizzazione

Durante l'esperienza ci siamo concentrati nel calcolo del gap energetico tra lo stato di ground e il primo stato eccitato dell'oscillatore armonico $\Delta E = E_1 - E_0$ e dell'elemento di matrice $|M_{01}|^2 = |\langle E_0 | \hat{x} | E_1 \rangle|^2$. Nel seguito vogliamo mostrare come generalizzare il procedimento seguito nel calcolo dei successivi livelli energetici $\Delta E_{0n} = E_n - E_0$ e in particolare mostreremo i risultati ottenuti nel caso $n = 2$. Come si vedrà tale metodo funziona solo grazie al fatto che siamo in grado di risolvere la teoria in modo analitico.

Innanzitutto ricordiamo brevemente che, data un'osservabile $O(\hat{x})$, la funzione di correlazione tra due punti del reticolo va come:

$$c(t) = \frac{1}{Z} \sum_{ij} e^{-E_i T} e^{-(E_j - E_i)t} |\langle E_i | O(\hat{x}) | E_j \rangle|^2 \quad (5)$$

In ordine decrescente i termini più incisivi nella precedente formula sono quelli proporzionali a $\langle E_0 | O(\hat{x}) | E_0 \rangle$, $\langle E_0 | O(\hat{x}) | E_1 \rangle$, $\langle E_0 | O(\hat{x}) | E_2 \rangle$, ...

Quindi da $c(t)$ si può estrarre il livello energetico $\Delta E_n = E_n - E_0$ a patto che si sappia trovare un operatore $O(\hat{x})$ tale per cui $\langle E_0 | O(\hat{x}) | E_m \rangle = 0 \quad \forall m < n$. Infatti in questo caso si ha che:

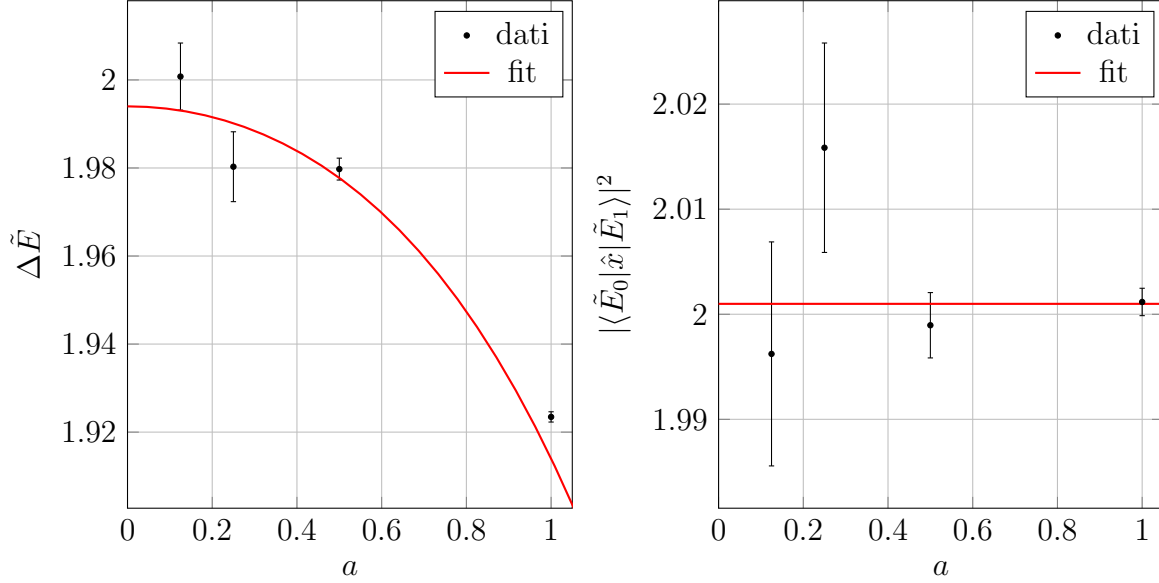
$$c(t) \sim e^{-E_0 T} e^{-(E_n - E_0)t} |\langle E_0 | O(\hat{x}) | E_n \rangle|^2 \quad (6)$$

e gli altri contributi saranno soppressi almeno come $e^{-(E_n - E_0)}$.

Nel caso dell'oscillatore armonico si conoscono le soluzioni analitiche degli autostati dell'e-

N	N_{bin}	D_{bin}	$\Delta\tilde{E}$	$t(\Delta\tilde{E})$	$ \langle\tilde{E}_0 \hat{x} \tilde{E}_2\rangle ^2$	$t(\tilde{M}_{02} ^2)$
64	10^5	50	1.9235(12)	1.12	2.0012(13)	0.92
128	10^4	150	1.9797(25)	0.006	1.999(3)	0.33
256	10^3	400	1.980(8)	1.85	2.016(10)	1.60
512	10^3	1500	2.001(8)	0.29	1.996(11)	0.36

Tabella 2: risultati nei vari reticoli e comparazione con i risultati teorici



nergia (anche sul reticolo), di conseguenza è possibile trovare degli operatori i cui elementi di matrice tra autostati 0 e m si annullino per $m < n$. Operatori che soddisfano questa condizione sono i polinomi di Hermite.

$$\langle\tilde{E}_0|\tilde{H}e_n(\hat{x})|\tilde{E}_m\rangle = 0 \quad \forall n < m \quad (7)$$

Per $n = 2$ si ha:

$$O(x) = 2m\bar{\omega}x^2 - 1 \quad (8)$$

$$|\langle\tilde{E}_0|O(\hat{x})|\tilde{E}_2\rangle|^2 = 2 \quad (9)$$

Una caratteristica interessante da notare è che l'elemento di matrice non dipende dalla discretizzazione. In tabella (6) mostriamo i risultati ottenuti nei vari reticoli, comparandoli con i valori teorici, il valore del $\tilde{\chi}^2 = 2.7$ e $\tilde{\chi}^2 = 0.96$

Lo stesso procedimento può essere generalizzato anche per gap energetici più ampi senza ulteriori complicazioni al di fuori del calcolo delle corrette normalizzazioni per i polinomi Hermite. Una proposta per il calcolo di $\Delta E_{3,0}$ è l'operatore:

$$O(x) = 2m\bar{\omega}x^3 - 3x;$$

	μ	μ_{theo}	$t(\mu)$
ΔE	1.994(7)	2.0	0.86
$ \langle E_0 \hat{x} E_2 \rangle ^2$	2.0010(12)	2.0	0.83

Tabella 3: risultati dell'interpolazione per ΔE a $|M_{02}|^2$

1.3 Hamiltoniana 2D

E' possibile generalizzare la simulazione a sistemi in n dimensioni. L'hamiltoniana, nel caso dell'oscillatore armonico in più dimensioni, è fattorizzabile nella somma di n oscillatori armonici monodimensionali tra loro indipendenti. Perciò può essere scritta come:

$$\mathcal{H}(\hat{\mathbf{x}}) = \sum_{i=1}^n \left(-\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_i^2 \hat{x}_i^2 \right) \quad (10)$$

Di conseguenza l'azione su reticolo si scrive:

$$S = a \sum_{j=0}^n \sum_i \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\mathbf{xx}[\mathbf{i} + 1] - \mathbf{xx}[\mathbf{i}]}{a} \right)^2 + \frac{1}{2}m\omega_j^2 \mathbf{xx}[\mathbf{i}]^2 \right] \quad (11)$$

Ci concentriamo ora sull'oscillatore bidimensionale isotropo ($\omega_1 = \omega_2$), per presentare le differenze del caso in esame con quello monodimensionale.

In questo caso l'hamiltoniana ha uno spettro degenere e i suoi autostati sono ottenibili come prodotto tensoriale degli autostati delle hamiltoniane monodimensionali. Per i primi tre livelli energetici si ha:

$$\begin{cases} |E_0\rangle = |E_0\rangle_x |E_0\rangle_y \\ |E_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|E_1\rangle_x |E_0\rangle_y + |E_0\rangle_x |E_1\rangle_y) \\ |E_2\rangle = |E_1\rangle_x |E_1\rangle_y \end{cases}$$

Introduciamo un reticolo temporale discretizzato in N valori a cui corrispondono N coppie (x, y) di coordinate. Applichiamo nuovamente la procedura di **sweep**, modificando i cammini della particella per entrambi i gradi di libertà sfruttando l'algoritmo Metropolis, in cui ΔS è, ora, la differenza tra le azioni in due dimensioni.

L'operatore di cui calcoliamo la funzione di correlazione in questo caso è $\hat{x} \times \hat{y}$ infatti, con questo operatore otteniamo che il contributo più pesante nel correlatore è dato dalla coppia $(i, j) = (0, 2)$ nell'equazione (5). I valori teorici con cui confrontare le osservabili sono perciò:

$$\begin{cases} \Delta E = E_2 - E_0 = 2\omega = 2 \\ |\langle E_0 | (\hat{x} \times \hat{y}) | E_2 \rangle|^2 = \frac{1}{(2m\omega)^2} = 0.25 \end{cases} \quad (12)$$

Dopo aver seguito una procedura analoga al caso mono dimensionale otteniamo i seguenti valori per energia ed elemento di matrice:

$$\begin{aligned} \Delta E &= 2.009(4) \\ |\langle E_0 | (\hat{x} \times \hat{y}) | E_2 \rangle|^2 &= 0.2489(6) \end{aligned} \quad (13)$$

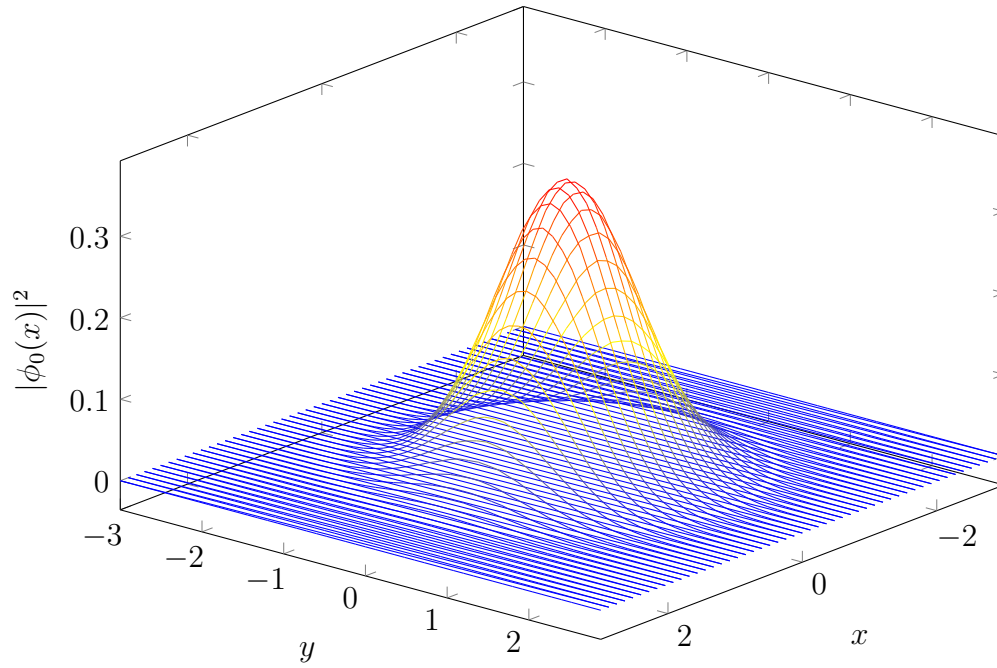


Figura 2: autofunzione dello stato di ground per l'oscillatore armonico bidimensionale isotropo

Che sono rispettivamente 2.25 e 1.8 deviazioni standard dal valore atteso. Anche in questo caso abbiamo ricavato la funzione d'onda in due casi, il primo isotropo riportato in figura (2), il secondo anisotropo riportato in figura (3).

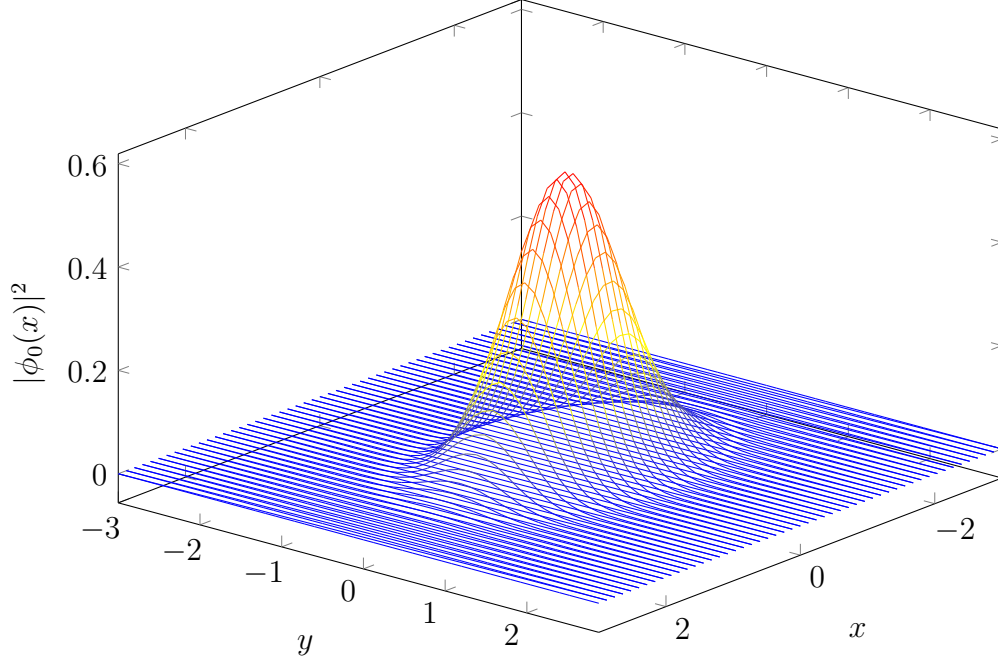


Figura 3: autofunzione dello stato di ground per l'oscillatore armonico bidimensionale anisotropo $\omega_x = 1$, $\omega_y = 2$

2 Oscillatore armonico perturbato da $\lambda \hat{x}^4$

Applichiamo ora l'algoritmo di Metropolis a un potenziale anarmonico, con l'obiettivo di calcolare le stesse osservabili fisiche studiate nel caso armonico. L'hamiltoniana di un oscillatore anarmonico ottenuto tramite una perturbazione quartica alla hamiltoniana libera in equazione [10] nel caso di $n = 1$ è

$$\mathcal{H}(\hat{\mathbf{x}}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + \lambda\hat{x}^4 \quad (14)$$

La versione discreta del funzionale si scrive

$$\mathcal{S} = a \left(\sum_{i=0}^{N-1} \frac{m}{2} \left(\frac{\mathbf{xx}[i+1] - \mathbf{xx}[i]}{a} \right)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \lambda \mathbf{xx}[i]^4 \right) \quad (15)$$

Simuliamo la teoria sui reticoli in tabella [5], modificando la probabilità di Boltzmann con cui vengono pesati i cammini della particella nella funzione di correlazione del sistema statistico. La variazione del funzionale azione tra **sweep** successivi si scrive come

$$\delta S = \delta S_{HO} + \lambda \sum_{i=0}^{N-1} (\mathbf{xx}_{\text{new}}[i]^4 - \mathbf{xx}[i]^4); \quad (16)$$

Indichiamo con δS_{HO} la variazione del funzionale azione dovuta ai termini di lagrangiana armonica e con $\mathbf{xx}[i]$ e $\mathbf{xx}_{\text{new}}[i]$ rispettivamente le posizioni della particella, al tempo fisico i fissato, prima e dopo la variazione del path tramite la procedura di **sweep**.

In questo caso, l'operatore di trasferimento e l'hamiltoniana non commutano, di conseguenza non è possibile sfruttare i risultati per le osservabili su reticolo ottenute dagli autostati di \hat{T}_a nonostante rimangano valide le espressioni che legano gap energetico ed elemento di matrice alle funzioni di correlazione.

2.1 Stima perturbativa di $\Delta\tilde{E}_{01}$ e $|M_{01}|^2$

Ricaviamo gli autovalori dell'hamiltoniana in equazione [14] dalla teoria delle perturbazioni non degenerate, trattando la perturbazione quartica $\mathcal{H}_I(\hat{x}) = \lambda\hat{x}^4$ all'hamiltoniana di un oscillatore armonico, nel limite in cui $\lambda \ll 1$. Scegliamo di sviluppare fino all'ordine λ^2 e impostiamo i valori di N_{bin} in modo che $\sigma_{\Delta\tilde{E}_{01}}$ sia di ordine $\mathcal{O}(\sigma_{\Delta\tilde{E}_{01}}) \geq 10^{-4}$ su ognuno dei reticoli presi in considerazione. La differenza di energia tra primo stato eccitato e ground state si scrive

$$\begin{aligned}\Delta E_{01}^{(\lambda)} &= \Delta E_{01} + \lambda (\langle E_1 | \hat{x}^4 | E_1 \rangle - \langle E_0 | \hat{x}^4 | E_0 \rangle) + \\ &\quad - \lambda^2 \left(\sum_{m \neq 1} \frac{|\langle E_1 | \hat{x}^4 | E_m \rangle|}{E_m - E_1} - \sum_{m \neq 0} \frac{|\langle E_0 | \hat{x}^4 | E_m \rangle|}{E_m - E_0} \right) + \mathcal{O}(\lambda^3) = \\ &= \Delta E_{01} + \lambda \frac{3}{m^2 \omega^2} - \lambda^2 \frac{18}{m^4 \omega^4 \Delta E_{01}} + \mathcal{O}(\lambda^3)\end{aligned}\tag{17}$$

dove $|E_0\rangle \dots |E_m\rangle$ e $E_0 \dots E_m$ sono rispettivamente gli autostati e gli autovalori della hamiltoniana imperturbata in equazione [10], nel caso di $n = 1$. Mentre l'elemento di matrice è:

$$|\tilde{M}_{01}|^2 = \frac{1}{2m\omega} - \lambda \frac{12}{(2m\omega)^3 \Delta E_{01}} + \lambda^2 \frac{525}{(2m\omega)^5 \Delta E_{01}^2} + \mathcal{O}(\lambda^3)\tag{18}$$

Otteniamo i risultati nel discreto effettuando le sostituzioni $\omega \rightarrow \bar{\omega}$ e $\Delta E_{01} \rightarrow \tilde{\omega}$

In tabella [4] riportiamo i risultati numerici delle simulazioni nel caso non perturbativo, per il quale scegliamo di adottare il parametro $\lambda = 10^{-2}$. Sostituendo $m = 1$ e $\omega = 1$ nelle equazioni [17] e [18] calcoliamo i valori teorici delle osservabili per i vari reticoli considerati, con cui costruiamo le variabili t-student. Notiamo che per quanto concerne il reticolo B_1 , il valore ottenuto dell'elemento di matrice si discosta molto dal valore atteso, questo ci porta a pensare che ci sia un contributo proporzionale ad a (spacing reticolare) nella non commutazione tra operatore di trasferimento ed hamiltoniana perturbata⁴.

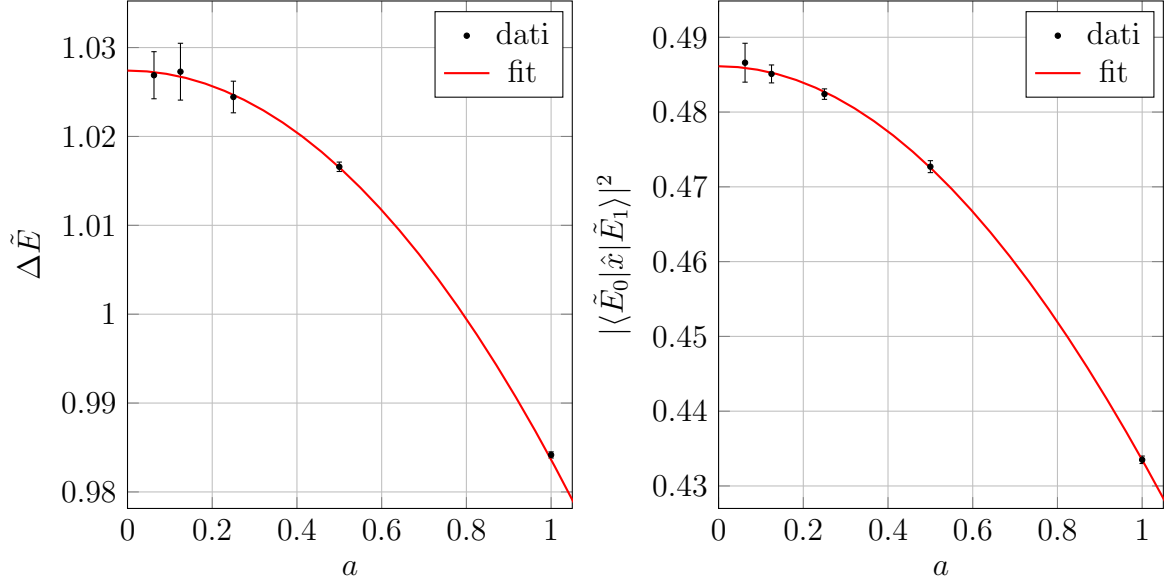
⁴i valori attesi sono stati calcolati omettendo gli effetti di non commutazione.

	N	N_{bin}	D_{bin}	$\Delta\tilde{E}_{01}$	$t(\Delta\tilde{E}_{01})$
B_1	64	1×10^5	50	0.9841(4)	1.16
B_2	128	3×10^4	150	1.0165(5)	0.18
B_3	256	3×10^3	400	1.0244(18)	0.43
B_4	512	1×10^3	1500	1.027(3)	0.05
B_5	1024	1×10^3	4000	1.027(3)	0.42

Tabella 4: Risultati su reticolo per il gap di energia

	N	N_{bin}	D_{bin}	$ \langle\tilde{E}_0 \hat{x} \tilde{E}_1\rangle ^2$	$t(\tilde{M}_{01} ^2)$
B_1	64	5×10^3	50	0.4335(5)	6.68
B_2	128	2×10^3	150	0.4727(8)	0.01
B_3	256	3×10^3	400	0.4824(7)	0.86
B_4	512	1×10^3	1500	0.4851(12)	0.47
B_5	1024	1×10^3	4000	0.4866(26)	0.14

Tabella 5: Risultati su reticolo per l'elemento di matrice



2.2 Limite non perturbativo

Seguiamo la procedura descritta nel paragrafo (1.1) per costruire l'istogramma della distribuzione di probabilità del ground state per l'oscillatore anarmonico nel regime non perturbativo in cui $\lambda = 1$. In figura (4) riportiamo i risultati del fit di $|\phi_0(x)|^2$ con una gaussiana. Come è possibile vedere in figura 4 l'andamento ora presenta una piccola deviazione dalla distribuzione normale. Una proposta per un miglior fit è quella di utilizzare il polinomio di Hermite:

$$H = \frac{e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \left(1 + \frac{\tau}{4!\sigma^2} H_4(x/\sigma) \right)$$

$\Delta E_{01}^{(th)}$	ΔE_{01}	$\mathfrak{t}(\Delta E_{01})$	$ \langle E_0 \hat{x} E_1\rangle ^{2(th)}$	$ \langle E_0 \hat{x} E_1\rangle ^2$	$\mathfrak{t}(\langle E_0 \hat{x} E_1\rangle ^2)$
1.028	1.027(7)	0.12	0.4866	0.4861(7)	0.7

Tabella 6: Risultati dell’extrapolazione al continuo per l’oscillatore anarmonico: le variabili con apice ”(th)” rappresentano i risultati teorici attesi sul reticolo, le variabili senza indici rappresentano i risultati dell’extrapolazione al continuo. Gli errori per le osservabili estrapolate al continuo vengono calcolati tramite la propagazione degli errori dei parametri della funzione di fit.

Il valore teorico, in questo caso, non può essere estratto dalla teoria delle perturbazioni, dunque riportiamo il risultato della nostra simulazione numerica:

$$\Delta E_{01} = 1.028 \pm 0.007$$

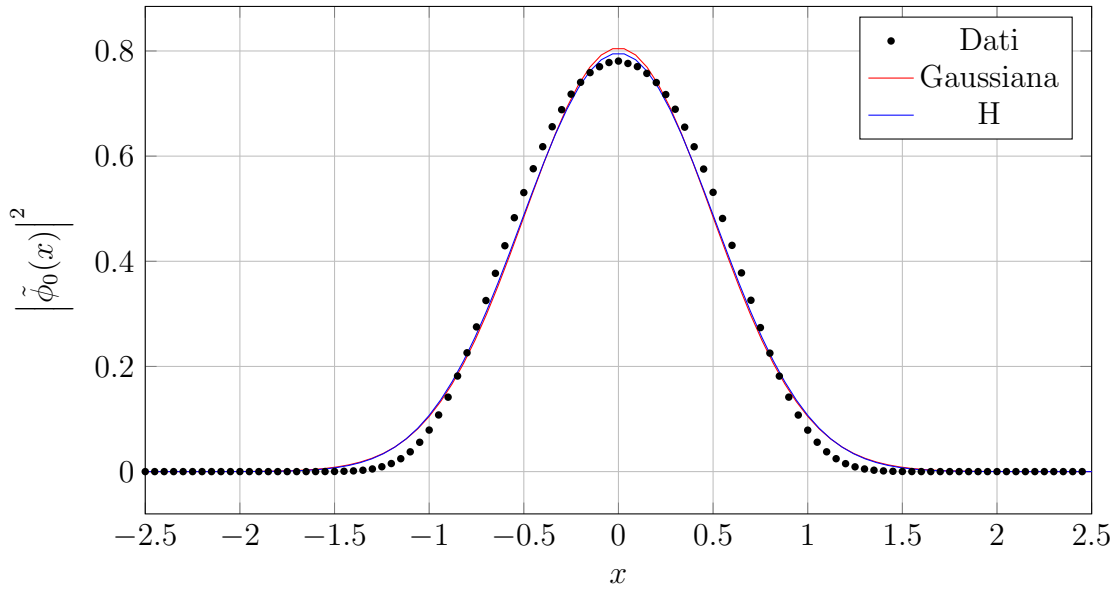


Figura 4: Densità di probabilità del ground state dell’oscillatore anarmonico in regime non perturbativo ($\lambda = 1$);

3 Potenziale Double Well

3.1 Analisi dell'effetto tunnel

In questa ultima sezione studiamo il comportamento di un sistema sottoposto ad un potenziale a *double well* della forma:

$$V(x) = \beta(x^2 - \alpha/2\beta)^2 \quad (19)$$

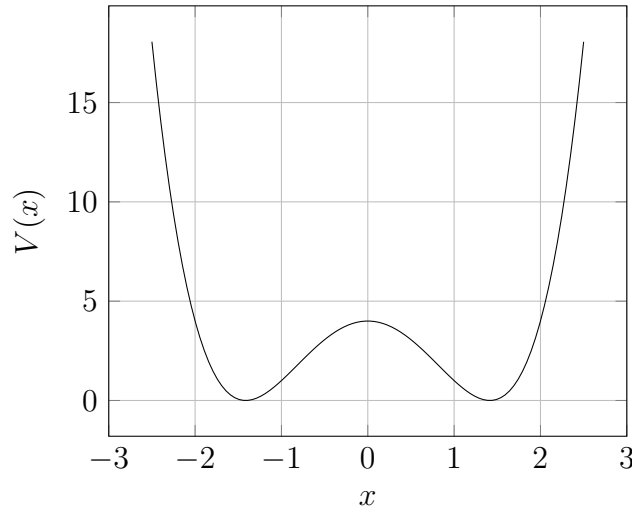


Figura 5: Potenziale double well

Come si vede dall'immagine in figura (5) il potenziale usato presenta due minimi degeneri separati da una barriera di potenziale.⁵ Questa proprietà si traduce nella possibilità per la particella di realizzare effetto tunnel tra le due buche.

Oltre all'effetto tunnel, la presenza della barriera di potenziale è responsabile di una complicazione nell'algoritmo Metropolis: Si consideri una inizializzazione simmetrica attorno allo 0 del primo path della particella e lo si porti a termalizzazione.

Se si fissa un valore per la massa sufficientemente elevato, il sistema è portato a scegliere uno dei due minimi e sarà maggiormente legato a quello scelto e la probabilità passare nell'altro minimo risulterà bassa. (i.e. il sistema impiegherà un numero elevato di sweeps per cambiare il GS in cui si trova).

Questo comportamento può essere descritto equivalentemente affermando che nello spazio delle fasi ci sono due zone disconnesse tra loro in cui la particella minimizza l'energia; ma che, con valori elevati della massa, sono difficilmente collegabili attraverso l'algoritmo Metropolis.

In figura (6) mostriamo una simulazione per cui è particolarmente complicato passare da una zona all'altra, si vedono infatti zone di ampiezza dell'ordine di 10^6 sweep nelle quali il sistema è costretto in una delle due buche. Invece in figura (7) sono mostrati i cammini di tre diverse particelle distinte tra loro per il valore della massa, sottoposte allo stesso potenziale.

⁵nel seguito fisseremo tali minimi nei punti $\pm\sqrt{2}$, scegliendo $\alpha = 4\beta$

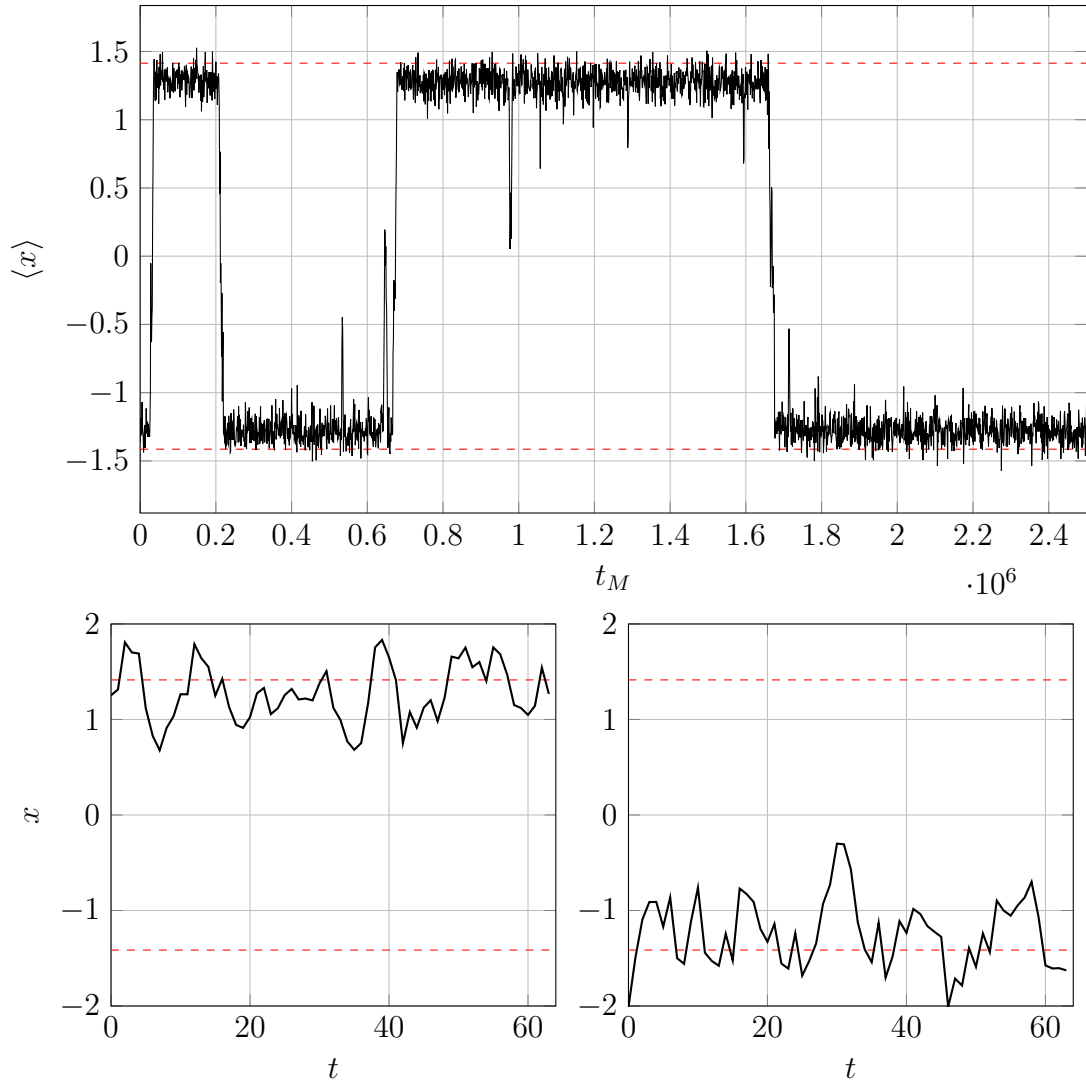


Figura 6: In alto il valore del parametro d'ordine $\langle x \rangle$ in funzione del tempo Markoviano t_M . In basso due path rispettivamente a $t_M = 0.8 \cdot 10^6$ e $t_M = 2.0 \cdot 10^6$. I parametri della simulazione sono $m = 7$, $\alpha = 0.8$, $\beta = 0.2$

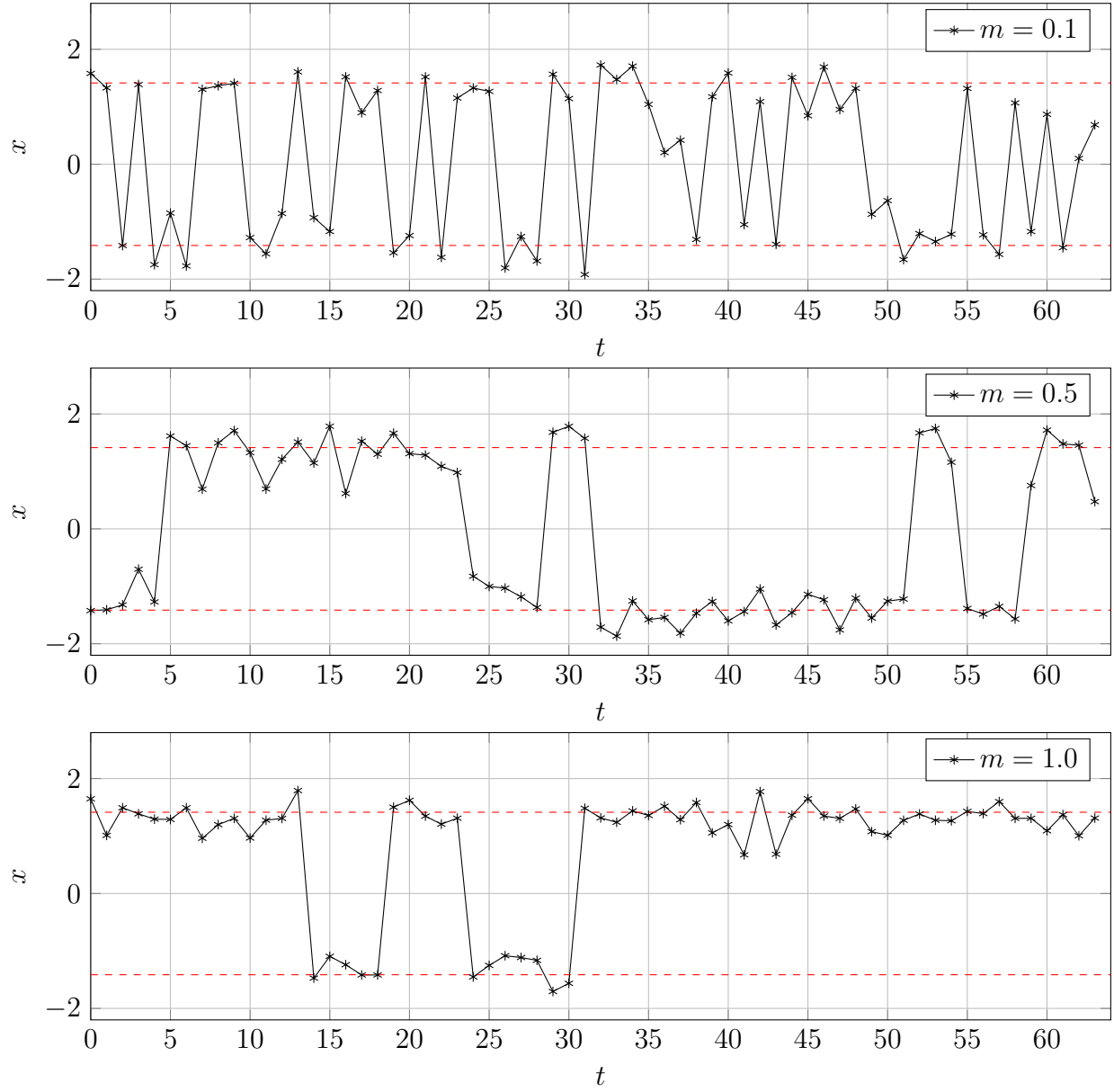


Figura 7: Tre path tipici della particella sottoposta al potenziale con parametri $\alpha = 4.0$, $\beta = 1.0$ per diversi valori della massa. Si nota che per masse minori l'effetto tunnel risulta più probabile

3.2 Distribuzione dello stato fondamentale

Anche in questo caso, seguendo la procedura già descritta nel paragrafo (1.1) si può ricostruire l'autofunzione dello stato di ground. Tuttavia sono necessari degli accorgimenti:

Come già mostrato, se la buca è sufficientemente profonda e la massa sufficientemente elevata, il primo cammino generato dall'algoritmo romperà la simmetria \mathbb{Z}_2 perciò se non si deve considerare un numero sufficientemente grande di configurazioni per annullare l'asimmetria. Il risultato è mostrato in figura(8), mentre il corrispettivo caso bidimensionale è mostrato in figura (9).

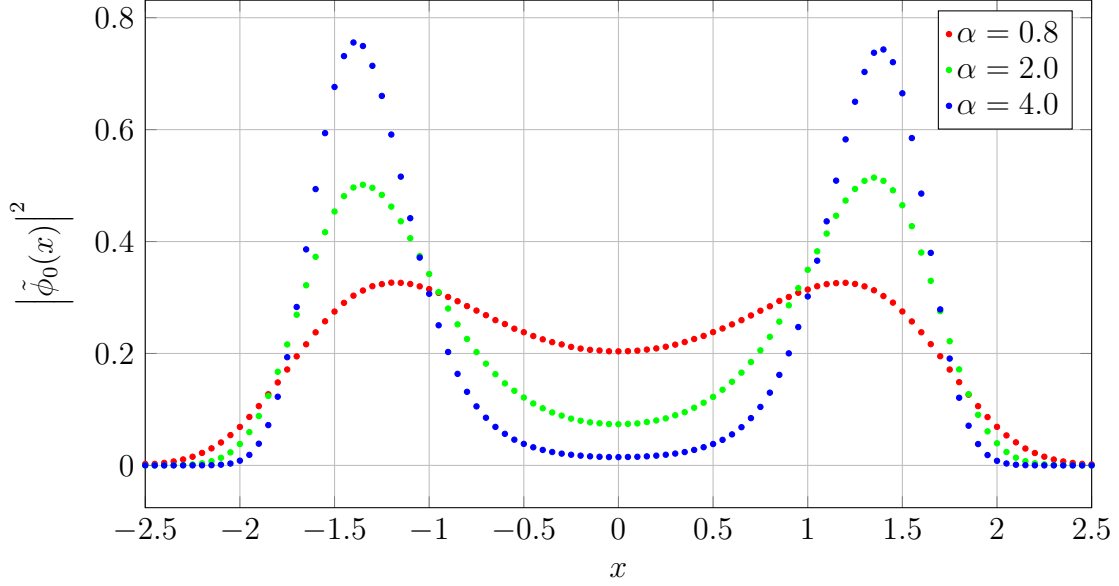


Figura 8: Autofunzione dello stato di ground per $m = 1$ a diversi valori di α e β

3.3 Calcolo del gap di energia

Per un sistema perturbato da una generica buca di potenziale $V(x) = -\alpha x^2 + \beta x^4$ l'hamiltoniana può essere scritta, come:

$$H(\hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \alpha \hat{x}^2 + \beta \hat{x}^4; \quad (20)$$

Per cui non è possibile trovare una soluzione analitica⁶. Inoltre, l'idea di considerare il termine quartico come una perturbazione viene subito scartata in quanto implicherebbe uno spettro dell'hamiltoniana libera illimitato inferiormente. Per procedere, data l'invarianza sotto traslazioni del sistema fisico in esame, scegliamo di sviluppare il potenziale del sistema nel minimo stabile ad ascissa positiva $x = \sqrt{\frac{\alpha}{2\beta}}$ ridefinendo $V(x)$ come $\rightarrow V(x - \sqrt{\frac{\alpha}{2\beta}})$. Otteniamo quindi:

$$V(x) = 2\alpha x^2 + 2\sqrt{2\alpha\beta}x^3 + \beta x^4; \quad (21)$$

⁶il termine costante è stato omissso poiché non contribuisce alla fisica

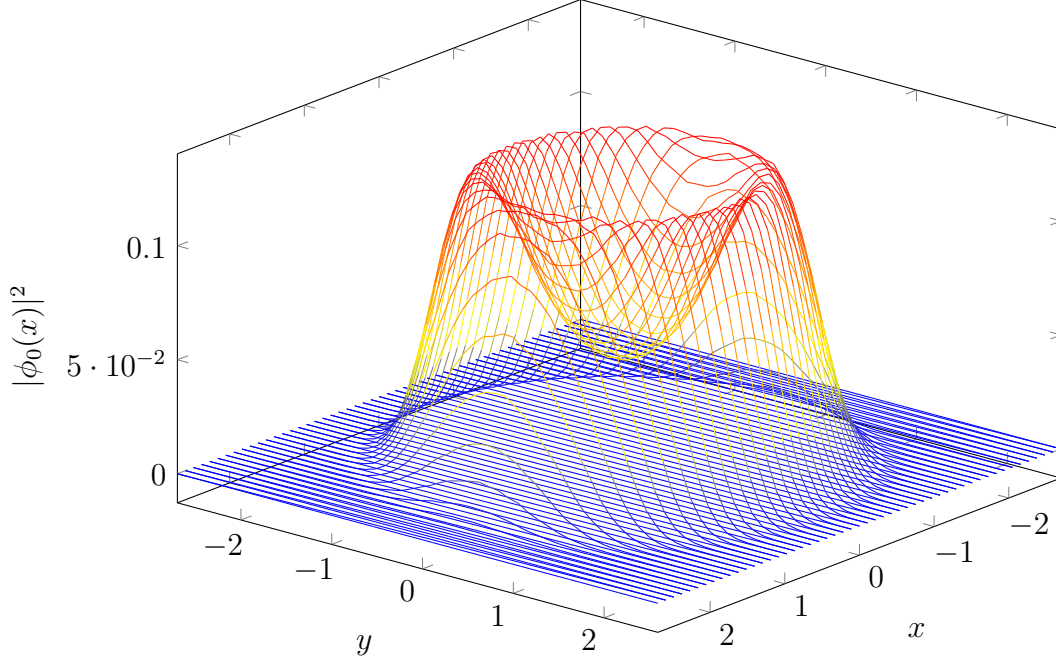


Figura 9: autofunzione dello stato di ground per il potenziale double well bidimensionale

Si noti che ora il termine al quadrato ha segno positivo e se consideriamo:

$$H(\hat{x})_{harm} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + 2\hat{x}^2 \quad (22)$$

$$H(\hat{x})_{pert} = 2\sqrt{2\alpha}\beta\hat{x}^3 + \beta\hat{x}^4; \quad (23)$$

Conosciamo le soluzioni per l'hamiltoniana imperturbata, che ora risulta essere un oscillatore armonico con $\alpha = \frac{m\omega^2}{4}$. Applichiamo la teoria delle perturbazioni ad H_{pert} come per il caso anarmonico; considerando, $\sqrt{\beta} \ll 1$, otteniamo il gap di energia tra primo stato eccitato e ground state

$$\Delta E = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}} + \left(\frac{3}{4m} - 30\sqrt{\frac{m}{\alpha}} \right) \frac{\beta}{\alpha} + \mathcal{O}(\beta) \quad (24)$$

Che porta ad un risultato numerico per $m =, \alpha = 4.0$:

$$\Delta E = 4 - \frac{57}{16}\beta$$

Per poter simulare questo tipo di potenziale non perturbativamente e senza traslazioni, come detto in precedenza, l'algoritmo Metropolis non è la migliore delle opzioni. A causa del tunneling, infatti, per alcuni tipi di buca anche inizializzare nel minimo scelto non è sufficiente per permettere ai path generati di decorrelarsi dopo un numero ragionevole di *sweeps*. Per poter diminuire gli effetti di autocorrelazione è necessario scegliere parametri adatti. Dalla Figura 10 è possibile vedere come l'algoritmo decorreli correttamente quando la barriera tra i due minimi è sufficientemente piccola, ovvero per $\frac{\beta}{\alpha} > 1.0$ e quando la buca è, al contrario,

molto profonda. La figura mostra come questo comportamento sia strettamente legato al tunnelling: quando le transizioni tra un minimo e l'altro sono tali da stabilizzare il sistema nel vuoto scelto per molti sweeps prima che un nuovo effetto tunnel avvenga, infatti, in questi casi la decorrelazione dell'intero path non avviene mai. Per alcune scelte di parametri, in principio, è possibile una simulazione senza complicazioni a patto che $\frac{\beta}{\alpha} \ll 1$. Il problema è che per valori t.c. l'errore della teoria delle perturbazioni abbia ordine di grandezza minore del valore atteso, i path non si decorrelano. Dunque le simulazioni non hanno esito positivo ed è necessario considerare un metodo differente per la computazione.

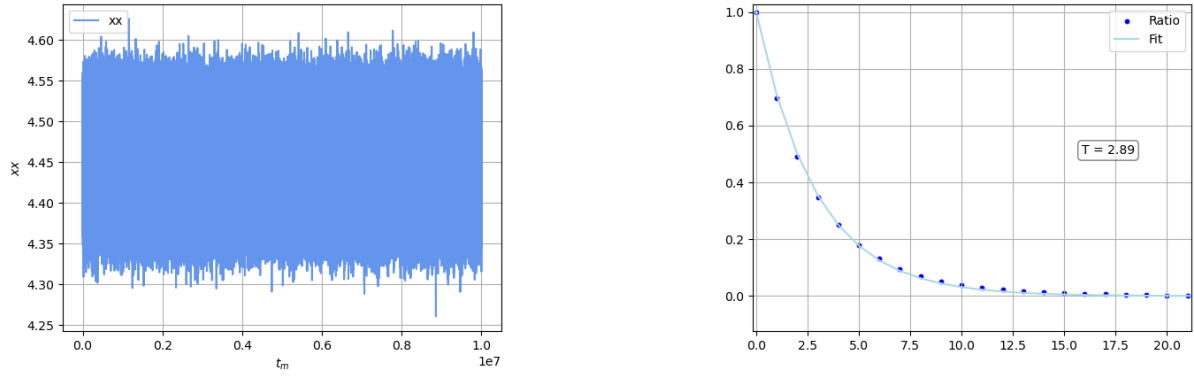


Figura 10: Per $\beta = 0.1, \alpha = 4.0$ il sistema rimane nel minimo in cui è stato inizializzato e può essere decorrelato

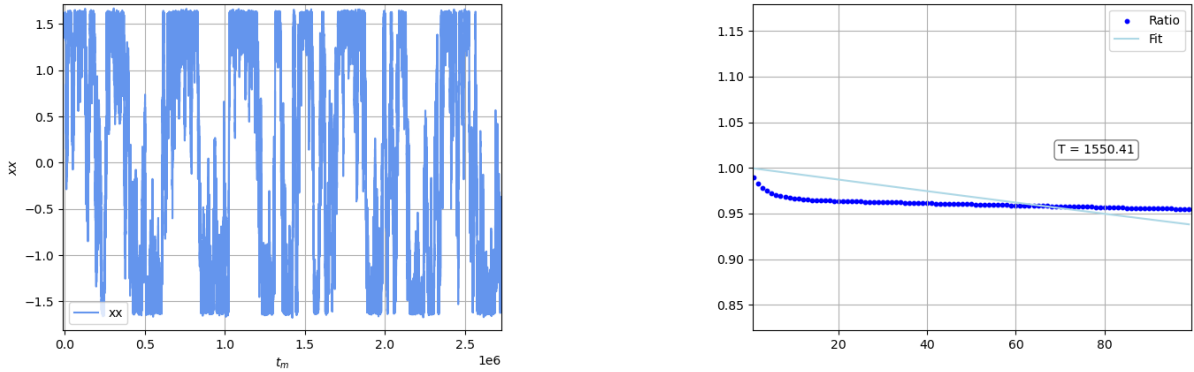


Figura 11: Per $\beta = 0.7, \alpha = 4.0$ l'effetto tunnel è permesso, ma il sistema cambia vuoto solo dopo molti sweep

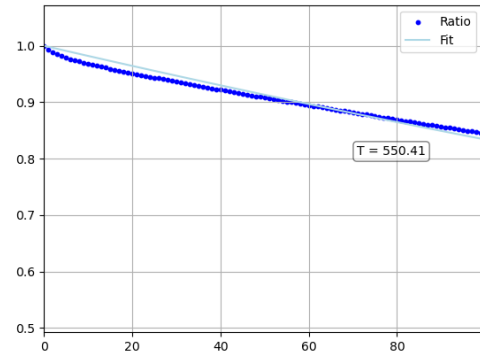
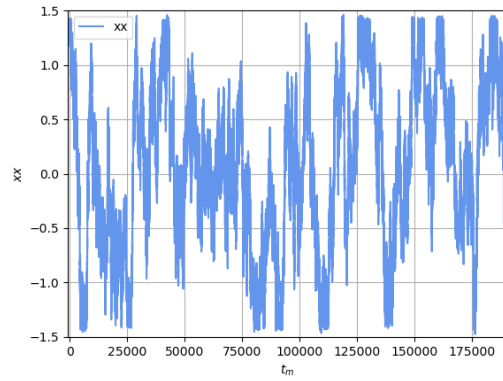


Figura 12: Per $\beta = 1.0, \alpha = 4.0$ l'effetto è più frequente.

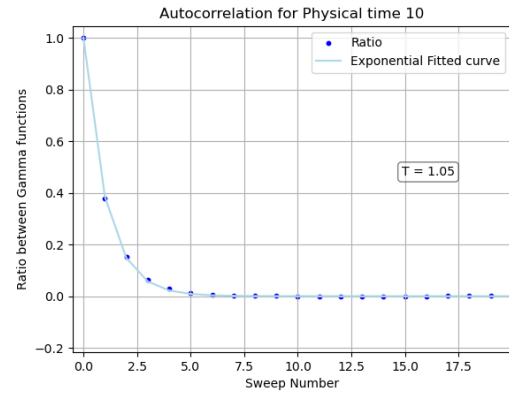
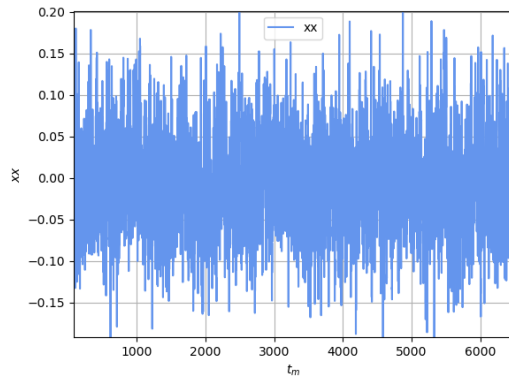


Figura 13: Per $\beta = 10.0, \alpha = 4.0$ l'effetto tunnel è molto probabile e la distinzione tra i minimi si perde: la decorrelazione è possibile

Riferimenti bibliografici

- [1] M. Creutz, B. Freedman, *A statistical approach to quantum mechanics*, 1980, ANNALS OF PHYSICS 132, 427-462 (1981)
- [2] Tran Duong Anh-Tai; Duc T. Hoang; Thu D. H. Truong; et. al, *Analytical study of the sth-order perturbative corrections to the solution to a one-dimensional harmonic oscillator perturbed by a spatially power-law potential $V(x) = \lambda x^\alpha$* . 2021, AIP Advances 11, 085310 (2021)